［利 用 の 手 引 き］

数式処理ソフトウエア Mathematica による プログラミング入門

犬塚裕樹†
Hiroki Inutsuka†

†久留米大学　医学部看護学科
†Kurume University, School of Nursing

1. はじめに

数式処理ソフトウエアは、電卓のように数値を入力して四則演算などの計算ができる。それにとどまらず、文字をつかった代数計算、式の因数分解や 2 次方程式を解くこと、および微分や積分の計算、そして、微分方程式までをも解くこともできる。さらに、数式のグラフ表示ができ、平面、立体、等高線の図をきれいに、ほとんど思い通りのグラフが作画できる。数式処理ソフトウエアの中では、市販の Mathematica は有名であり、信頼性が高く、世界中のいろいろな教育、研究分野で利用されている。

本稿では、Mathematica をつかって、乱数をつかった確率的シミュレーションであるモンテカルロ・シミュレーションを扱うプログラミングの方法を説明する。この Mathematica では、計算式において、fortran、 C などとは異なる大きな特徴を持っている。シミュレーション例として、円周率πの推定と集団遺伝学のおける遺伝的浮動の効果をあげる。

2. リスト機能

Mathematica のリストの機能が重要であり、また、おもしろい。Mathematica では、リストの機能をうまくつかうことで簡単な式で計算を効率的におこなうことができる。

関数 Range[ ]をつかうことで、簡単にリストを作ることができる。単に、Range[n]と入力することで、1～n までの整数のリストがつくられる。たとえば、つぎのように入力する。大文字、小文字の区別に注意する。

```
Range[5]
  ⇒ {1,2,3,4,5}
```

記号⇒ のあとが出力結果を示している。{….}がリストを示している。1〜5 までのリストが出力された。つぎに、下記のように入力した。

```
Range[10,14]
⇒ {10,11,13,14}
```

こんどは、10 から 14 までのリストが出力された。増分の刻み幅を指定する下記の入力の形式もある：

```
Range[10,20,3]
⇒ {10,13,16}
```

これは、10 から 20 までのリストが、増分の刻み幅３でつくられた。

さらに、リストの出力様式に、変数を含むようにするためには、関数 Table が使える。Table[n, {n, 6}]　と入力すると、n のリストで、n を 1 から 6 まで変えたリストが出力される。つぎのように記述する：

```
Table[n, {n, 6}]
⇒ {1,2,3,4,5,6}
```

反復数が必要でないときは、つぎのように入力する：

```
Table[1, {5}]
⇒ {1,1,1,1,1,1}
```

この形式では、1 が 5 個ならんだリストが出力される。

```
Table[0,{4},{2}]
⇒ {{0,0},{0,0},{0,0},{0,0}}
```

上の式では、要素を 0 とするペアのリストが 4 個、出力される。このような込み入ったリストも出力できるようになっている。

また、関数 Select は有用である。

```
Select[{1,2,3}, EvenQ]
```
Σ {2}

リスト{1, 2, 3}の中から、偶数の数字を選ぶ。条件を与えると、それをみたすものをリストの中から探し出すのである。一方、奇数の数字を選ぶときは、EvenQ の代わりに OddQ を入力すればよい。つぎのように入力する。

```
Select[{1,2,3}, OddQ]
```
Σ {1,3}

3. モンテカルロ・シミュレーション

ある確率で発生する事象 E に関して、乱数によって模擬実験をおこなうことができる。疑似乱数を発生させ、その値によってその事象が生じたかどうかを判断し、シミュレーションする。これはモンテカルロ・シミュレーションとよばれる。Mathematica では、満足できるほどの信頼性をもつ疑似乱数を容易に発生させることができる。

いま、事象 E は確率 p で生じるものとする。Mathematica によって 0 から 1 までの一様乱数を発生させ、その乱数の値が p 以下であれば事象 E が生じたとする。

実数の乱数を発生する関数、RandomReal の使い方をみてみよう。つぎのように「?」を先頭につけて関数名 RandomReal を入力すると関数 RandomReal の機能と使い方の説明が表示される：

```
?RandomReal
```
Σ

RandomReal[] 0から1までの範囲の擬似乱数実数を与える.
RandomReal[{x_{min}, x_{max}}] x_{min} から x_{max} までの範囲の擬似乱数実数を与える.
RandomReal[x_{max}] 0からx_{max} までの範囲の擬似乱数実数を与える.
RandomReal[*range*, *n*] *n* 個の擬似乱数実数のリストを与える.
RandomReal[*range*, {n_1, n_2, ...}] 擬似乱数実数の $n_1 \times n_2 \times \cdots$ 配列を与える. ≫

0 から 1 の間の乱数を発生させるためには、つぎのように入力する。

```
RandomReal[ ]
 ⇨ 0.42311
```

この関数を入力するごとに異なる乱数が 1 つ出力される。複数の乱数をリストとして出力するには、つぎのように入力する。

```
RandomReal[{0,1},{5}]
 ⇨ {0.8324, 0.12757, 0.22483, 0.5112, 0.96981}
```

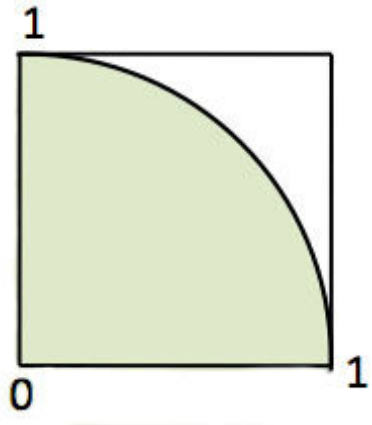
この入力で、0 から 1 までの乱数が 5 個、リストとして出力される。個数を指定する場合には、{0,1}を省略した RandomReal[{5}] の記述ではエラーとなる。

4. 円周率πの推定

乱数をつかったシミュレーションの 1 つの例として、円周率πを推定しよう。円の面積に注目して、つぎのようにおこなう。0 から 1 の、2 つの乱数 r_1 と r_2 を発生させ、平面の 1 点の座標 (r_1, r_2) を指定する。そこで、その点が円の内部に位置するかどうかを調べるために、

$$r_1^2 + r_2^2 < 1 \qquad (1)$$

をみたすかどうかを、計算し判定する。



この一連の操作を n 回繰り返したとき、n 個の(r_1, r_2)の点の内、上の不等式をみたす個数を m とする。すると、n/m は、正方形の面積 1 に対する半径 1 の円の面積の 4 等分の割合を推定するものである。したがって、つぎの式がなりたつ。

$$\frac{n}{m} \cong \frac{\pi \cdot 1^2 / 4}{1}$$

これから、π は

$$\pi \cong \frac{4n}{m} \qquad (2)$$

となるので、m と n の測定された数によって、π を推定することができる。

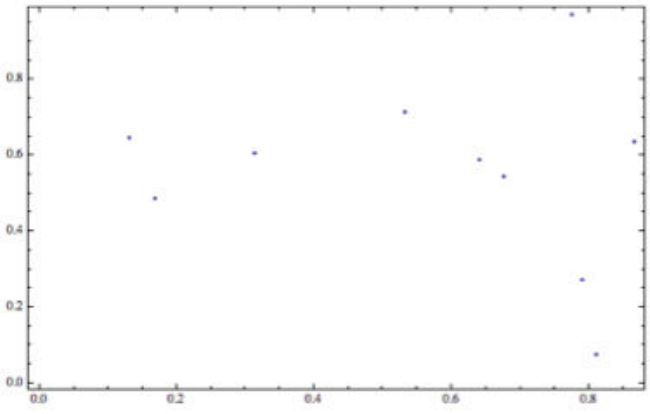
具体的に、計算をつぎのように進めていこう。

```
RandomReal[{0,1},{10,2}];
```
(3)

この入力で、0 から 1 の乱数を 10 個発生させた。ただし、ペアのリストとして出力させた。これは、つぎのような形式である：

{○,○}, {○,○}, {○,○},....., {○,○}
1　　2　　3　　.....　10

10 ペアを表示するのは、出力が煩雑になるので、式の最後に「;」を追記した。これによって出力結果が表示されない。



発生させた 10 点の、平面上での分布の様子をみてみよう。つぎのように入力する。

```
LinePlot[%]
```

「%」は直前の結果をあらわすものである。左図には、作画された 10 個の点の平面分布が表示されている。

RandomReal[{0,1},{10,2}];
の式は、関数 Table をつかっても記述でき、同じ結果をもたらす。

```
Table[RandomReal[],{10},{2}];
```

と記述してもよい。

これから、(1)の条件をみたす n の個数を調べよう。ここで、式(3)のリストの個数を定数から変数に割り当てて、利用しやすくしよう。

```
plot[n_]:=RandomReal[{0,1},{n,2}];
```

この式では、点の個数を変数 n とおいて、plot という関数をつくった。そこで、つぎのように入力する：

```
Length[Select[plot[10], #[[1]]^2 + #[[2]]^2 <1 &]]
```

9 (4)

ペアの 10 個の乱数リストに対して、式(1)の条件をみたす点を、Select 関数をつかって選び出した。つぎに、そのリストの要素の個数を求める必要がある。このために関数 Length をつかった。

「# ... &」は準関数、あるいは、無名関数とよばれるもので、#は引数を表す。一般に、関数にはそれ特有の名前をつけるが、1 度しか使うことがない関数であれば、名前がない関数の方が利用するうえで便利である。[[.]]はリストの要素をあらわす。[[1]]と[[2]]は、それぞれ、リストの 1 番目と 2 番目の要素である。

Select と準関数の使い方として、つぎのようなことができる：

```
Select[{0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.8, 0.9}, # > 0.7 &]
```

{0.8,0.9}

この式では、リストの中から 0.7 より大きい数のリスト{0.8,0.9}がもとめられる。

さて、円周率の結果をだそう。式（2）より、

```
N[4%/10]
```

3.6

こうして、10 個の点によって、πを推定することができた。点の個数を増やせば、πの推定精度があがる。点を 1000 個に増やしてみよう。

```
Length[Select[plot[1000], #[[1]]^2 + #[[2]]^2 <1 &]];
N[4%/1000]
```

Σ 3.132

よく知られている値の、3.141 に近づいた。

一般に、ここでおこなう繰り返しの計算は、よく知られたコンピュータ言語である fortran、C などでは、do ループの方法でおこなう。もちろん、Mathematica にも、繰り返しの do ループの式もつかえるが、ここで示したリストをつかった方法が容易な式が記述でき、これが Mathematica の大きな特徴である。リストをつかった方が演算時間も短いことがわかっている。

5. 集団遺伝学における遺伝的浮動の効果

集団遺伝学において、モンテカルロ・シミュレーションは有効である。生物集団の大きさが無限大ではなく、有限である場合には、遺伝子頻度の変化に対して、遺伝的浮動とよばれている有限サイズ効果が生じる。その効果をモンテカルロ・シミュレーションでみてみよう。

いま、1 倍体生物を考え、特定の 1 つの遺伝子座に注目し、1 対立遺伝子 A の世代にわたる頻度変化をみよう。親世代における遺伝子プールでの遺伝子 A の頻度が p だとする$(0 < p < 1)$。この遺伝子プールから遺伝子の任意抽出によって、子供世代における A の遺伝子頻度を求める。ここで、集団の大きさは N だとする。

Mathematica によって、0 から 1 までの一様乱数を発生させ、その値が p 以下であれば、遺伝子プールから遺伝子 A が抽出されたと考える。これを N 回繰り返し、子供世代の遺伝子を構成する。遺伝子 A が抽出された個数を算出し、子供世代の遺伝子 A の頻度 p'をもとめるのである。

まず、簡単な場合として、N = 10, p = 0.5 とおき、遺伝子頻度 p'をもとめてみよう。

```
a=RandomReal[{0,1},{10}];
Select[a, # <0.5 &]

Σ  {0.394229, 0.424147, 0.22103, 0.47294}
```

0 から 1 までの一様乱数を 10 個発生させ、そのリストを変数 a とおいた。そのリストに対して、0.5 より小さい乱数を選ぶようにした。出力をみると、0.5 より小さい乱数が正しく選ばれたことがわかる。条件をみたす乱数の個数は 4 個だった。

ここで、集団の大きさを変数として、上の式を書き換えよう。

```
a2[n_]:=RandomReal[{0,1},{n}];
Length[Select[a2[100]], #<0.5 &]]
Σ  45
```

集団の大きさを変数 n として、乱数のリストとして新しい関数 a2 を定義した。具体的な数値として、集団の大きさが 100 とした。出力結果から、子供世代には、45 個の A 遺伝子が生じたことをあらわしている。

最後に、つぎの式を書く：

```
N[%/100]
Σ  0.45
```

遺伝子頻度 p’ は、遺伝的浮動の効果により、0.45 に減少したことが示された。

6. おわりに

Mathematica の高度な機能を知れば知るほど、この数式処理ソフトウエアのすごさを感じる。このソフトウエアのおかげで数学を扱う際の苦悩が大きく軽減する。

数学はいろいろな応用の分野でも役に立つ。しかし、実際に数学を扱う際には、多くの面倒なことがでてくる。そのようなときに、このソフトウエアがおおいにサポートしてくれる。逆に、このソフトウエアのおかげで数学をさらに深く、あるいは幅広く勉強したいという気持ちにさせてくれる。中学、高校レベルの数学の勉強では物足らなかった基礎数学が、医学・看護学の分野おける応用として数学モデルを考えるときに、機械的な苦痛がなくなるために、とても楽しい気持ちにさせてくれる。

医学・看護学の教育・研究の分野で、これまで以上に数学の重要さが認識され、学習カリキュラムに取り入れられて、将来の教育、研究に役にたつ状況になることを期待している。そのようなときには、数式処理ソフトウエアが重要な役割を担うに違いない。

参考文献

[1]Stephen Wolfram, Mathematica Book, 5th ed Wolfram Media, 2003
第 5 版日本語版　Wolfram Media, Inc.
[2]入門 Mathematica 決定版　Ver.7 対応。　日本 mathematica ユーザー会編　東京電機大学出版局。2009
[3]犬塚裕樹、2009、数式処理ソフトウエア Mathematica 入門　久留米大学コンピュータジャーナル vol 23・24、 27-36